

Hodnocení vedoucího diplomové práce

Autorka práce: **Bc. Zuzana Majdišová**

Název práce: **Využití paralelismu pro analýzu biomolekul**

Cílem práce bylo využít paralelismus GPU pro konstrukci Voronoi diagramu atomů v molekule. Vrcholy a hrany této nelineární struktury se používají v analýze biomolekul, například při modelování rozhraní molekul proteinů s prostředím.

Práce začíná shrnutím teorie tohoto typu diagramu a popisem algoritmu konstrukce pomocí trasování hran diagramu. Následuje průzkum obecných možností paralelizace na GPU a popis zvolené platformy OpenCL. Po analýze, které části algoritmu se hodí k výpočtu na GPU, je zvolena brute-force varianta algoritmu, kdy se pro každou hranu diagramu prochází všechny atomy v molekule ve snaze spočítat vrchol Voronoi diagramu na hraně. Tato část se počítá na GPU, a to nejdříve v jednoduché přesnosti (float) a podezřelé výsledky se počítají znovu ve dvojitě přesnosti (double). Pro další urychlení výpočtu je navrženo omezení prohledávacího prostoru, aby se nemusely procházet všechny atomy. Po dohodě s vedoucím toto omezení nebylo implementováno, aby mohlo být více času věnováno experimentům. Navržené GPU řešení bylo testováno na modelech molekul oproti sekvenčním i paralelním CPU variantám algoritmu. Výsledky experimentů ukazují, že navržené řešení vítězí v kategorii brute-force, ale neobstojí proti pokročilejším technikám filtrování prostoru. Implementace ale poskytuje ještě mnoho prostoru pro zjednodušení a optimalizaci. Odchylkám výsledků při jednoduché a dvojitě přesnosti je věnována celá kapitola.

Práce splnila zadání, ikdyž navržené řešení nepřekoná pokročilejší techniky. Řešení je přímo využitelné v existující aplikaci pro analýzu molekul (CAVER Analyst - MUNI Brno). Aktivita diplomantky sice byla z počátku nižší, pracovní nasazení ve finále však bylo nadprůměrné.

Navrhuji hodnocení známkou **v ý b o r n ě** a práci doporučuji k obhajobě.

V Plzni 28. 5. 2014

Mgr. Martin Maňák

